```
data_lach31

_publ_section_comment
;
The NEt4 cations had disordered carbon chains, due to this refinement
was carried out with all the atoms within
the NEt4 cations being isotropic. The positions of these atoms could
not be resolved absolutely causing some
intra and intermolecular contacts involving these groups to be short.
Squeeze was carried out on the structure, to make allowance for
disordered solvent molecules most likely extra
benzylamine.
;

_audit_creation_method            SHELXL-97
_chemical_name_systematic
;
 ?
;
_chemical_name_common             (NEt4)4(C6H5CH2NH3)3[SiW10O36
(H3CCOC6H4PO)]
_chemical_melting_point           ?
_chemical_formula_moiety          ?
_chemical_formula_sum
 'C54 H107 N6 O38 P Si W10'
_chemical_formula_weight          3504.22

loop_
 _atom_type_symbol
 _atom_type_description
 _atom_type_scat_dispersion_real
 _atom_type_scat_dispersion_imag
 _atom_type_scat_source
 'C'  'C'   0.0181   0.0091
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'H'  'H'   0.0000   0.0000
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'N'  'N'   0.0311   0.0180
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'O'  'O'   0.0492   0.0322
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'Si'  'Si'   0.2541   0.3302
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'P'  'P'   0.2955   0.4335
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'W'  'W'  -5.4734   5.5774
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'

_symmetry_cell_setting            Monoclinic
_symmetry_space_group_name_H-M    'C 2/c'

loop_
 _symmetry_equiv_pos_as_xyz
 'x, y, z'
 '-x, y, -z+1/2'
 'x+1/2, y+1/2, z'
 '-x+1/2, y+1/2, -z+1/2'
 '-x, -y, -z'
 'x, -y, z-1/2'
 '-x+1/2, -y+1/2, -z'
 'x+1/2, -y+1/2, z-1/2'

_cell_length_a                    60.30(2)
_cell_length_b                    14.641(5)
_cell_length_c                    25.846(9)
```

```
_cell_angle_alpha                  90.00
_cell_angle_beta                   108.051(16)
_cell_angle_gamma                  90.00
_cell_volume                       21695(13)
_cell_formula_units_Z              8
_cell_measurement_temperature      293(2)
_cell_measurement_reflns_used      ?
_cell_measurement_theta_min        3.1
_cell_measurement_theta_max        50.9

_exptl_crystal_description         ?
_exptl_crystal_colour              Colourless
_exptl_crystal_size_max            0.06
_exptl_crystal_size_mid            0.06
_exptl_crystal_size_min            0.04
_exptl_crystal_density_meas        ?
_exptl_crystal_density_diffrn      2.146
_exptl_crystal_density_method      'not measured'
_exptl_crystal_F_000               13040
_exptl_absorpt_coefficient_mu      19.862
_exptl_absorpt_correction_type     empirical
_exptl_absorpt_correction_T_min    ?
_exptl_absorpt_correction_T_max    ?
_exptl_absorpt_process_details     'Sadabs'

_exptl_special_details
;
 ?
;

_diffrn_ambient_temperature        200(2)
_diffrn_radiation_wavelength       1.54178
_diffrn_radiation_type             CuK\a
_diffrn_radiation_source           'fine-focus sealed tube'
_diffrn_radiation_monochromator    graphite
_diffrn_measurement_device_type    'Bruker Smart 6000 CCD'
_diffrn_measurement_method         'CCD scans'
_diffrn_detector_area_resol_mean   ?
_diffrn_standards_number           ?
_diffrn_standards_interval_count   ?
_diffrn_standards_interval_time    ?
_diffrn_standards_decay_%          ?
_diffrn_reflns_number              51017
_diffrn_reflns_av_R_equivalents    0.1294
_diffrn_reflns_av_sigmaI/netI      0.1495
_diffrn_reflns_limit_h_min         -58
_diffrn_reflns_limit_h_max         60
_diffrn_reflns_limit_k_min         -14
_diffrn_reflns_limit_k_max         14
_diffrn_reflns_limit_l_min         -25
_diffrn_reflns_limit_l_max         20
_diffrn_reflns_theta_min           3.08
_diffrn_reflns_theta_max           50.92
_reflns_number_total               11175
_reflns_number_gt                  5402
_reflns_threshold_expression       >2sigma(I)

_computing_data_collection         SMART
_computing_cell_refinement         SAINTPLUS
_computing_data_reduction          SAINTPLUS
_computing_structure_solution      SHELXTL
_computing_structure_refinement    'SHELXL-97 (Sheldrick, 1997)'

_refine_special_details
;
 Refinement of F^2^ against ALL reflections.  The weighted R-factor
```

```
wR and
 goodness of fit S are based on F^2^, conventional R-factors R are
based
 on F, with F set to zero for negative F^2^. The threshold expression
of
 F^2^ > 2sigma(F^2^) is used only for calculating R-factors(gt) etc.
and is
 not relevant to the choice of reflections for refinement.  R-factors
based
 on F^2^ are statistically about twice as large as those based on F,
and R-
 factors based on ALL data will be even larger.
;

_refine_ls_structure_factor_coef  Fsqd
_refine_ls_matrix_type            full
_refine_ls_weighting_scheme       calc
_refine_ls_weighting_details
 'calc w=1/[\s^2^(Fo^2^)+(0.0953P)^2^+0.0000P] where P=(Fo^2^+2Fc^2
^)/3'
_atom_sites_solution_primary      direct
_atom_sites_solution_secondary    difmap
_atom_sites_solution_hydrogens    geom
_refine_ls_hydrogen_treatment     constr
_refine_ls_extinction_method      none
_refine_ls_extinction_coef        ?
_refine_ls_number_reflns          11175
_refine_ls_number_parameters      644
_refine_ls_number_restraints      100
_refine_ls_R_factor_all           0.1555
_refine_ls_R_factor_gt            0.0764
_refine_ls_wR_factor_ref          0.1962
_refine_ls_wR_factor_gt           0.1734
_refine_ls_goodness_of_fit_ref    0.955
_refine_ls_restrained_S_all       0.957
_refine_ls_shift/su_max           0.050
_refine_ls_shift/su_mean          0.003

loop_
 _atom_site_label
 _atom_site_type_symbol
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 _atom_site_U_iso_or_equiv
 _atom_site_adp_type
 _atom_site_occupancy
 _atom_site_symmetry_multiplicity
 _atom_site_calc_flag
 _atom_site_refinement_flags
 _atom_site_disorder_assembly
 _atom_site_disorder_group
C1 C 0.4596(4) 0.1766(19) 0.3940(15) 0.096(10) Uiso 1 1 d G . .
C2 C 0.4725(7) 0.181(3) 0.4487(13) 0.27(3) Uiso 1 1 d G . .
H2 H 0.4663 0.2090 0.4734 0.329 Uiso 1 1 calc R . .
C3 C 0.4949(7) 0.145(3) 0.4665(16) 0.37(5) Uiso 1 1 d G . .
H3 H 0.5036 0.1477 0.5031 0.447 Uiso 1 1 calc R . .
C4 C 0.5042(5) 0.103(3) 0.430(3) 0.21(2) Uiso 1 1 d GD . .
C5 C 0.4912(8) 0.098(3) 0.375(2) 0.35(4) Uiso 1 1 d G . .
H5 H 0.4975 0.0707 0.3501 0.416 Uiso 1 1 calc R . .
C6 C 0.4689(7) 0.135(3) 0.3570(13) 1.0(2) Uiso 1 1 d G . .
H6 H 0.4602 0.1321 0.3204 1.259 Uiso 1 1 calc R . .
C7 C 0.5285(5) 0.057(3) 0.449(2) 0.159(17) Uiso 1 1 d D . .
C8 C 0.5428(13) 0.041(6) 0.508(2) 0.37(5) Uiso 1 1 d D . .
H8A H 0.5574 0.0123 0.5098 0.559 Uiso 1 1 calc R . .
H8B H 0.5343 0.0012 0.5251 0.559 Uiso 1 1 calc R . .
```

H8C H 0.5458 0.0979 0.5272 0.559 Uiso 1 1 calc R . .
C9 C 0.4120(12) 0.388(5) 0.499(3) 0.22(3) Uiso 0.77(3) 1 d P . .
H9A H 0.4009 0.3427 0.5031 0.260 Uiso 0.77(3) 1 calc PR . .
H9B H 0.4091 0.4448 0.5158 0.260 Uiso 0.77(3) 1 calc PR . .
C10 C 0.4415(13) 0.350(4) 0.531(2) 0.34(6) Uiso 0.77(3) 1 d PG . .
C11 C 0.4382(8) 0.259(5) 0.542(2) 0.18(3) Uiso 0.77(3) 1 d PG . .
H11 H 0.4234 0.2328 0.5292 0.213 Uiso 0.77(3) 1 calc PR . .
C12 C 0.4569(13) 0.206(3) 0.572(2) 0.22(3) Uiso 0.77(3) 1 d PG . .
H12 H 0.4547 0.1454 0.5797 0.261 Uiso 0.77(3) 1 calc PR . .
C13 C 0.4790(9) 0.245(6) 0.592(2) 0.34(6) Uiso 0.77(3) 1 d PG . .
H13 H 0.4916 0.2100 0.6122 0.408 Uiso 0.77(3) 1 calc PR . .
C14 C 0.4823(10) 0.336(6) 0.581(3) 0.41(7) Uiso 0.77(3) 1 d PG . .
H14 H 0.4971 0.3621 0.5942 0.497 Uiso 0.77(3) 1 calc PR . .
C15 C 0.4635(16) 0.389(3) 0.551(3) 0.37(6) Uiso 0.77(3) 1 d PG . .
H15 H 0.4657 0.4496 0.5437 0.438 Uiso 0.77(3) 1 calc PR . .
C16 C 0.4101(10) 0.395(5) 0.236(3) 0.18(3) Uiso 0.71(3) 1 d PD . .
H16A H 0.4022 0.4342 0.2053 0.218 Uiso 0.71(3) 1 calc PR . .
H16B H 0.3995 0.3464 0.2377 0.218 Uiso 0.71(3) 1 calc PR . .
C17 C 0.4323(13) 0.353(5) 0.226(3) 0.37(7) Uiso 0.71(3) 1 d PGD . .
C18 C 0.4306(9) 0.268(5) 0.202(2) 0.20(3) Uiso 0.71(3) 1 d PG . .
H18 H 0.4160 0.2436 0.1831 0.236 Uiso 0.71(3) 1 calc PR . .
C19 C 0.4507(16) 0.218(3) 0.205(3) 0.27(4) Uiso 0.71(3) 1 d PG . .
H19 H 0.4495 0.1612 0.1884 0.318 Uiso 0.71(3) 1 calc PR . .
C20 C 0.4725(10) 0.254(6) 0.232(3) 0.400 Uiso 0.71(3) 1 d PGU . .
H20 H 0.4859 0.2213 0.2346 0.480 Uiso 0.71(3) 1 calc PR . .
C21 C 0.4742(12) 0.340(7) 0.257(3) 0.400 Uiso 0.71(3) 1 d PGU . .
H21 H 0.4887 0.3637 0.2755 0.480 Uiso 0.71(3) 1 calc PR . .
C22 C 0.4541(19) 0.389(4) 0.254(3) 0.400 Uiso 0.71(3) 1 d PGU . .
H22 H 0.4552 0.4461 0.2702 0.480 Uiso 0.71(3) 1 calc PR . .
N1 N 0.3857(6) 0.977(3) 0.5902(15) 0.184(15) Uiso 1 1 d D . .
C23 C 0.4002(8) 0.901(3) 0.6120(16) 0.178(18) Uiso 1 1 d D . .
H23A H 0.3905 0.8549 0.6212 0.214 Uiso 1 1 calc R . .
H23B H 0.4115 0.9205 0.6458 0.214 Uiso 1 1 calc R . .
C24 C 0.4136(11) 0.855(4) 0.577(3) 0.31(3) Uiso 1 1 d D . .
H24A H 0.4222 0.8037 0.5970 0.464 Uiso 1 1 calc R . .
H24B H 0.4243 0.8979 0.5700 0.464 Uiso 1 1 calc R . .
H24C H 0.4029 0.8341 0.5438 0.464 Uiso 1 1 calc R . .
C25 C 0.4009(7) 1.064(3) 0.5855(18) 0.19(2) Uiso 1 1 d D . .
H25A H 0.3913 1.1186 0.5773 0.231 Uiso 1 1 calc R . .
H25B H 0.4081 1.0554 0.5571 0.231 Uiso 1 1 calc R . .
C26 C 0.4209(11) 1.074(4) 0.645(3) 0.31(3) Uiso 1 1 d D . .
H26A H 0.4310 1.1239 0.6447 0.461 Uiso 1 1 calc R . .
H26B H 0.4299 1.0183 0.6533 0.461 Uiso 1 1 calc R . .
H26C H 0.4135 1.0839 0.6727 0.461 Uiso 1 1 calc R . .
C27 C 0.3699(6) 1.013(3) 0.6215(16) 0.153(16) Uiso 1 1 d D . .
H27A H 0.3794 1.0140 0.6594 0.184 Uiso 1 1 calc R . .
H27B H 0.3582 0.9664 0.6183 0.184 Uiso 1 1 calc R . .
C28 C 0.3564(9) 1.106(4) 0.611(2) 0.24(3) Uiso 1 1 d D . .
H28A H 0.3479 1.1126 0.6367 0.366 Uiso 1 1 calc R . .
H28B H 0.3458 1.1070 0.5748 0.366 Uiso 1 1 calc R . .
H28C H 0.3673 1.1554 0.6158 0.366 Uiso 1 1 calc R . .
C29 C 0.3709(7) 0.968(3) 0.5320(17) 0.172(18) Uiso 1 1 d D . .
H29A H 0.3810 0.9566 0.5099 0.206 Uiso 1 1 calc R . .
H29B H 0.3630 1.0257 0.5203 0.206 Uiso 1 1 calc R . .
C30 C 0.3525(8) 0.892(3) 0.521(2) 0.24(3) Uiso 1 1 d D . .
H30A H 0.3439 0.8907 0.4832 0.364 Uiso 1 1 calc R . .
H30B H 0.3420 0.9041 0.5419 0.364 Uiso 1 1 calc R . .
H30C H 0.3601 0.8346 0.5321 0.364 Uiso 1 1 calc R . .
C31 C 0.3858(12) 0.849(3) 0.357(3) 0.360 Uiso 1 1 d DU . .
H31A H 0.3952 0.8709 0.3350 0.432 Uiso 1 1 calc R . .
H31B H 0.3777 0.9005 0.3662 0.432 Uiso 1 1 calc R . .
C32 C 0.4018(13) 0.805(6) 0.409(3) 0.426 Uiso 1 1 d DU . .
H32A H 0.4103 0.8520 0.4333 0.639 Uiso 1 1 calc R . .
H32B H 0.4126 0.7645 0.4005 0.639 Uiso 1 1 calc R . .
H32C H 0.3926 0.7712 0.4270 0.639 Uiso 1 1 calc R . .
C33 C 0.3645(11) 0.706(3) 0.363(3) 0.430 Uiso 1 1 d D . .

H33A H 0.3586 0.6503 0.3431 0.516 Uiso 1 1 calc R . .
H33B H 0.3795 0.6919 0.3898 0.516 Uiso 1 1 calc R . .
C34 C 0.3474(10) 0.739(4) 0.392(2) 0.27(3) Uiso 1 1 d D . .
H34A H 0.3465 0.6949 0.4189 0.399 Uiso 1 1 calc R . .
H34B H 0.3322 0.7472 0.3662 0.399 Uiso 1 1 calc R . .
H34C H 0.3527 0.7964 0.4099 0.399 Uiso 1 1 calc R . .
C35 C 0.3437(9) 0.808(5) 0.285(3) 0.35(4) Uiso 1 1 d D . .
H35A H 0.3328 0.8059 0.3061 0.416 Uiso 1 1 calc R . .
H35B H 0.3448 0.8711 0.2752 0.416 Uiso 1 1 calc R . .
C36 C 0.3346(12) 0.759(6) 0.239(3) 0.41(6) Uiso 1 1 d D . .
H36A H 0.3211 0.7905 0.2164 0.608 Uiso 1 1 calc R . .
H36B H 0.3301 0.7000 0.2484 0.608 Uiso 1 1 calc R . .
H36C H 0.3460 0.7529 0.2207 0.608 Uiso 1 1 calc R . .
C37 C 0.3789(19) 0.729(5) 0.285(3) 0.46(7) Uiso 1 1 d D . .
H37A H 0.3669 0.7006 0.2552 0.557 Uiso 1 1 calc R . .
H37B H 0.3896 0.6825 0.3041 0.557 Uiso 1 1 calc R . .
C38 C 0.3919(13) 0.802(6) 0.262(3) 0.37(5) Uiso 1 1 d D . .
H38A H 0.3972 0.7757 0.2342 0.559 Uiso 1 1 calc R . .
H38B H 0.4050 0.8243 0.2911 0.559 Uiso 1 1 calc R . .
H38C H 0.3815 0.8520 0.2473 0.559 Uiso 1 1 calc R . .
C39 C 0.2379(10) 0.150(3) 0.239(2) 0.29(3) Uiso 1 1 d D . .
H39A H 0.2521 0.1854 0.2460 0.348 Uiso 1 1 calc R . .
H39B H 0.2313 0.1598 0.2681 0.348 Uiso 1 1 calc R . .
C40 C 0.2203(16) 0.177(5) 0.183(3) 0.47(6) Uiso 1 1 d D . .
H40A H 0.2170 0.2410 0.1832 0.711 Uiso 1 1 calc R . .
H40B H 0.2061 0.1429 0.1777 0.711 Uiso 1 1 calc R . .
H40C H 0.2268 0.1632 0.1548 0.711 Uiso 1 1 calc R . .
C41 C 0.2226(9) 0.017(5) 0.252(2) 0.32(4) Uiso 1 1 d D . .
H41A H 0.2214 -0.0496 0.2512 0.387 Uiso 1 1 calc R . .
H41B H 0.2079 0.0419 0.2296 0.387 Uiso 1 1 calc R . .
C42 C 0.2285(11) 0.052(4) 0.311(2) 0.30(3) Uiso 1 1 d D . .
H42A H 0.2172 0.0301 0.3269 0.444 Uiso 1 1 calc R . .
H42B H 0.2284 0.1176 0.3107 0.444 Uiso 1 1 calc R . .
H42C H 0.2437 0.0306 0.3317 0.444 Uiso 1 1 calc R . .
C43 C 0.2687(7) 0.035(3) 0.258(3) 0.26(3) Uiso 1 1 d D . .
H43A H 0.2777 0.0571 0.2357 0.310 Uiso 1 1 calc R . .
H43B H 0.2745 0.0620 0.2945 0.310 Uiso 1 1 calc R . .
C44 C 0.2673(11) -0.068(4) 0.260(3) 0.28(3) Uiso 1 1 d D . .
H44A H 0.2823 -0.0929 0.2799 0.424 Uiso 1 1 calc R . .
H44B H 0.2628 -0.0917 0.2232 0.424 Uiso 1 1 calc R . .
H44C H 0.2559 -0.0862 0.2769 0.424 Uiso 1 1 calc R . .
C45 C 0.2309(11) 0.027(5) 0.1717(18) 0.27(3) Uiso 1 1 d D . .
H45A H 0.2166 0.0619 0.1593 0.327 Uiso 1 1 calc R . .
H45B H 0.2266 -0.0372 0.1686 0.327 Uiso 1 1 calc R . .
C46 C 0.2452(18) 0.046(7) 0.133(4) 0.508 Uiso 1 1 d D . .
H46A H 0.2366 0.0261 0.0966 0.762 Uiso 1 1 calc R . .
H46B H 0.2597 0.0132 0.1448 0.762 Uiso 1 1 calc R . .
H46C H 0.2483 0.1102 0.1322 0.762 Uiso 1 1 calc R . .
N6 N 0.3219(10) 0.554(4) 0.061(2) 0.58(5) Uiso 1 1 d DU . .
C47 C 0.3460(10) 0.533(6) 0.081(3) 0.52(6) Uiso 1 1 d DU . .
H47A H 0.3481 0.4924 0.1121 0.620 Uiso 1 1 calc R . .
H47B H 0.3541 0.5894 0.0957 0.620 Uiso 1 1 calc R . .
C48 C 0.3583(12) 0.490(5) 0.044(3) 0.38(5) Uiso 1 1 d D . .
H48A H 0.3749 0.4908 0.0614 0.566 Uiso 1 1 calc R . .
H48B H 0.3547 0.5247 0.0106 0.566 Uiso 1 1 calc R . .
H48C H 0.3531 0.4285 0.0357 0.566 Uiso 1 1 calc R . .
C49 C 0.3063(11) 0.469(4) 0.068(3) 0.32(4) Uiso 1 1 d D . .
H49A H 0.2902 0.4870 0.0622 0.387 Uiso 1 1 calc R . .
H49B H 0.3124 0.4419 0.1041 0.387 Uiso 1 1 calc R . .
C50 C 0.3087(17) 0.398(6) 0.020(4) 0.47(6) Uiso 1 1 d D . .
H50A H 0.3011 0.3417 0.0231 0.700 Uiso 1 1 calc R . .
H50B H 0.3249 0.3874 0.0250 0.700 Uiso 1 1 calc R . .
H50C H 0.3014 0.4252 -0.0147 0.700 Uiso 1 1 calc R . .
C51 C 0.3100(14) 0.579(6) 0.001(2) 0.62(10) Uiso 1 1 d D . .
H51A H 0.3143 0.5327 -0.0205 0.748 Uiso 1 1 calc R . .
H51B H 0.3170 0.6360 -0.0055 0.748 Uiso 1 1 calc R . .

C52 C 0.2827(14) 0.591(7) -0.022(3) 0.47(6) Uiso 1 1 d D . .
H52A H 0.2788 0.6143 -0.0589 0.701 Uiso 1 1 calc R . .
H52B H 0.2776 0.6338 -0.0002 0.701 Uiso 1 1 calc R . .
H52C H 0.2753 0.5335 -0.0224 0.701 Uiso 1 1 calc R . .
C53 C 0.3147(15) 0.630(4) 0.092(3) 0.400 Uiso 1 1 d DU . .
H53A H 0.3255 0.6303 0.1291 0.480 Uiso 1 1 calc R . .
H53B H 0.2995 0.6145 0.0952 0.480 Uiso 1 1 calc R . .
C54 C 0.313(2) 0.727(5) 0.070(5) 0.61(10) Uiso 1 1 d D . .
H54A H 0.3081 0.7678 0.0920 0.916 Uiso 1 1 calc R . .
H54B H 0.3028 0.7278 0.0332 0.916 Uiso 1 1 calc R . .
H54C H 0.3286 0.7451 0.0690 0.916 Uiso 1 1 calc R . .
N2 N 0.3678(7) 0.779(4) 0.3238(17) 0.24(2) Uiso 1 1 d D . .
N3 N 0.2426(7) 0.048(3) 0.2325(16) 0.185(15) Uiso 1 1 d D . .
N4 N 0.4100(8) 0.402(3) 0.444(2) 0.26(2) Uiso 1 1 d . . .
H4A H 0.4241 0.4065 0.4407 0.389 Uiso 1 1 calc R . .
H4B H 0.4020 0.4530 0.4326 0.389 Uiso 1 1 calc R . .
H4C H 0.4025 0.3548 0.4249 0.389 Uiso 1 1 calc R . .
N5 N 0.4156(8) 0.440(3) 0.279(2) 0.25(2) Uiso 1 1 d . . .
H5A H 0.4205 0.4955 0.2730 0.376 Uiso 1 1 calc R . .
H5B H 0.4269 0.4117 0.3043 0.376 Uiso 1 1 calc R . .
H5C H 0.4031 0.4464 0.2904 0.376 Uiso 1 1 calc R . .
O1 O 0.3802(3) 0.2066(12) 0.2295(8) 0.078(6) Uani 1 1 d . . .
O2 O 0.4089(3) 0.0561(13) 0.2531(8) 0.095(7) Uani 1 1 d . . .
O3 O 0.4185(3) 0.2027(13) 0.3129(8) 0.074(6) Uani 1 1 d . . .
O4 O 0.4025(2) 0.0575(9) 0.3528(8) 0.064(6) Uani 1 1 d . . .
O5 O 0.4191(2) 0.2002(10) 0.4152(7) 0.061(5) Uani 1 1 d . . .
O6 O 0.4075(3) 0.0452(11) 0.4595(8) 0.084(6) Uani 1 1 d . . .
O7 O 0.3800(2) 0.1990(11) 0.4444(6) 0.061(5) Uani 1 1 d . . .
O8 O 0.3576(3) 0.2520(17) 0.5205(8) 0.127(10) Uani 1 1 d . . .
O9 O 0.3541(3) 0.3548(14) 0.4307(7) 0.085(7) Uani 1 1 d . . .
O10 O 0.3297(3) 0.5240(12) 0.4114(9) 0.113(8) Uani 1 1 d . . .
O11 O 0.3718(3) 0.5020(12) 0.3971(10) 0.110(8) Uani 1 1 d . . .
O12 O 0.3333(3) 0.5113(11) 0.3092(9) 0.079(6) Uani 1 1 d . . .
O13 O 0.3719(3) 0.5092(12) 0.2756(11) 0.125(9) Uani 1 1 d . . .
O14 O 0.3311(4) 0.5372(13) 0.2022(8) 0.102(7) Uani 1 1 d U . .
O15 O 0.3547(3) 0.3705(13) 0.2138(7) 0.083(6) Uani 1 1 d . . .
O16 O 0.3596(4) 0.2714(16) 0.1231(7) 0.118(8) Uani 1 1 d . . .
O17 O 0.3774(2) 0.1994(9) 0.3362(7) 0.052(5) Uani 1 1 d . . .
O18 O 0.3546(2) 0.3631(10) 0.3204(7) 0.059(5) Uani 1 1 d . . .
O19 O 0.3384(2) 0.2146(10) 0.3577(6) 0.051(5) Uani 1 1 d . . .
O20 O 0.3389(2) 0.2198(11) 0.2579(7) 0.068(6) Uani 1 1 d . . .
O21 O 0.3656(3) 0.0549(11) 0.2605(7) 0.077(6) Uani 1 1 d . . .
O22 O 0.3648(3) 0.0492(10) 0.3867(7) 0.064(5) Uani 1 1 d . . .
O23 O 0.3395(3) 0.1073(15) 0.4377(9) 0.100(7) Uani 1 1 d U . .
O24 O 0.3167(3) 0.2583(13) 0.4270(8) 0.094(7) Uani 1 1 d . . .
O25 O 0.3129(3) 0.3749(11) 0.3488(8) 0.075(6) Uani 1 1 d . . .
O26 O 0.3141(3) 0.3815(11) 0.2343(7) 0.069(5) Uani 1 1 d . . .
O27 O 0.3181(3) 0.2766(13) 0.1562(7) 0.089(7) Uani 1 1 d . . .
O28 O 0.3417(3) 0.1426(19) 0.1718(8) 0.125(10) Uani 1 1 d . . .
O29 O 0.3231(4) -0.0335(15) 0.1955(12) 0.166(12) Uani 1 1 d . . .
O30 O 0.3275(2) 0.0501(10) 0.2809(9) 0.061(5) Uani 1 1 d U . .
O31 O 0.3217(4) -0.0442(15) 0.3813(11) 0.141(9) Uani 1 1 d U . .
O32 O 0.3020(3) 0.1205(12) 0.3557(9) 0.096(7) Uani 1 1 d U . .
O33 O 0.2732(3) 0.2785(15) 0.3499(10) 0.114(7) Uani 1 1 d U . .
O34 O 0.2964(2) 0.2457(11) 0.2704(8) 0.071(5) Uani 1 1 d U . .
O35 O 0.2733(3) 0.2954(17) 0.1662(10) 0.135(9) Uani 1 1 d . . .
O36 O 0.3032(3) 0.1316(13) 0.2000(9) 0.111(8) Uani 1 1 d . . .
O37 O 0.4332(3) 0.3369(14) 0.3785(10) 0.111(8) Uani 1 1 d . . .
O38 O 0.5342(8) 0.030(3) 0.411(2) 0.28(2) Uiso 1 1 d . . .
Si1 Si 0.35212(11) 0.2521(5) 0.3175(3) 0.050(2) Uani 1 1 d . . .
P1 P 0.43063(12) 0.2365(7) 0.3740(5) 0.080(3) Uani 1 1 d . . .
W1 W 0.39228(2) 0.11630(10) 0.28163(6) 0.0703(5) Uani 1 1 d . . .
W2 W 0.39185(2) 0.10989(9) 0.40735(6) 0.0646(5) Uani 1 1 d . . .
W3 W 0.34975(3) 0.23842(12) 0.45158(7) 0.0912(6) Uani 1 1 d . . .
W4 W 0.34408(2) 0.45668(10) 0.37838(7) 0.0825(5) Uani 1 1 d . . .
W5 W 0.34487(2) 0.46361(10) 0.25363(7) 0.0843(6) Uani 1 1 d . . .

```
W6 W 0.35098(3) 0.25485(13) 0.18054(7) 0.0944(6) Uani 1 1 d . . .
W7 W 0.33022(3) 0.07264(11) 0.22377(9) 0.1012(7) Uani 1 1 d . . .
W8 W 0.32957(2) 0.06337(11) 0.36932(9) 0.1026(7) Uani 1 1 d . . .
W9 W 0.30106(2) 0.26406(11) 0.35031(7) 0.0893(6) Uani 1 1 d . . .
W10 W 0.30164(2) 0.27341(11) 0.20920(7) 0.0897(6) Uani 1 1 d . . .

loop_
 _atom_site_aniso_label
 _atom_site_aniso_U_11
 _atom_site_aniso_U_22
 _atom_site_aniso_U_33
 _atom_site_aniso_U_23
 _atom_site_aniso_U_13
 _atom_site_aniso_U_12
O1 0.073(11) 0.072(14) 0.097(16) -0.025(12) 0.039(11) 0.030(11)
O2 0.091(13) 0.101(16) 0.095(16) -0.003(13) 0.032(12) 0.062(13)
O3 0.040(9) 0.098(16) 0.084(16) 0.030(13) 0.019(11) 0.015(10)
O4 0.030(8) 0.004(10) 0.148(18) 0.000(10) 0.013(10) 0.004(7)
O5 0.051(10) 0.042(12) 0.083(14) -0.005(10) 0.012(10) 0.023(9)
O6 0.072(11) 0.049(13) 0.122(18) 0.030(12) 0.017(12) 0.046(10)
O7 0.050(9) 0.071(13) 0.048(12) 0.018(10) -0.007(9) -0.013(10)
O8 0.103(15) 0.23(3) 0.060(17) 0.054(16) 0.042(12) 0.114(17)
O9 0.073(12) 0.127(19) 0.050(14) -0.027(13) 0.014(10) 0.025(12)
O10 0.116(16) 0.059(14) 0.17(2) -0.060(14) 0.050(16) 0.026(13)
O11 0.103(16) 0.045(13) 0.18(2) -0.032(14) 0.050(16) 0.015(12)
O12 0.060(11) 0.035(12) 0.15(2) -0.004(12) 0.037(12) 0.012(9)
O13 0.095(15) 0.043(14) 0.26(3) 0.025(16) 0.087(18) 0.013(12)
O14 0.123(13) 0.068(12) 0.113(14) 0.057(11) 0.033(11) 0.015(11)
O15 0.065(11) 0.101(17) 0.087(16) 0.023(13) 0.031(11) 0.047(11)
O16 0.150(18) 0.19(2) 0.026(13) 0.002(14) 0.043(13) 0.077(17)
O17 0.057(10) 0.029(10) 0.076(13) -0.022(9) 0.028(9) -0.004(8)
O18 0.053(10) 0.033(12) 0.087(15) -0.014(10) 0.016(10) -0.016(9)
O19 0.042(8) 0.048(11) 0.066(13) 0.023(9) 0.024(9) 0.015(8)
O20 0.032(9) 0.064(13) 0.086(16) -0.008(11) -0.014(10) 0.003(9)
O21 0.108(14) 0.036(12) 0.082(15) -0.006(10) 0.021(12) 0.007(11)
O22 0.062(10) 0.043(12) 0.093(15) 0.037(10) 0.036(11) 0.023(9)
O23 0.065(10) 0.131(15) 0.126(15) 0.035(12) 0.062(11) 0.018(10)
O24 0.079(12) 0.125(18) 0.092(17) 0.059(14) 0.046(12) 0.058(13)
O25 0.059(10) 0.053(13) 0.125(18) 0.018(11) 0.047(11) 0.025(10)
O26 0.064(11) 0.058(13) 0.080(14) 0.010(11) 0.013(10) 0.001(10)
O27 0.101(14) 0.118(17) 0.044(13) -0.016(12) 0.019(11) 0.061(13)
O28 0.073(13) 0.22(3) 0.085(18) 0.077(18) 0.023(12) -0.031(16)
O29 0.121(18) 0.073(18) 0.26(3) -0.109(19) -0.01(2) -0.007(14)
O30 0.033(8) 0.018(9) 0.123(14) 0.024(9) 0.010(9) 0.001(7)
O31 0.123(14) 0.106(15) 0.193(17) 0.055(13) 0.048(13) -0.041(12)
O32 0.086(11) 0.059(12) 0.145(15) 0.043(11) 0.038(11) -0.006(10)
O33 0.085(11) 0.111(14) 0.150(16) 0.020(12) 0.042(11) 0.027(11)
O34 0.046(9) 0.062(11) 0.081(13) 0.025(10) -0.013(9) 0.032(8)
O35 0.051(11) 0.16(2) 0.15(2) 0.030(18) -0.044(13) 0.002(13)
O36 0.067(12) 0.064(15) 0.17(2) -0.030(14) -0.017(13) -0.018(11)
O37 0.074(13) 0.040(15) 0.21(3) 0.035(14) 0.026(15) -0.014(11)
Si1 0.031(3) 0.054(6) 0.065(6) -0.007(5) 0.015(4) 0.002(4)
P1 0.045(4) 0.076(8) 0.119(9) 0.020(6) 0.026(5) 0.002(5)
W1 0.0630(8) 0.0595(11) 0.0887(13) -0.0100(9) 0.0241(8) 0.0168(8)
W2 0.0500(7) 0.0577(10) 0.0860(12) 0.0181(9) 0.0207(8) 0.0139(7)
W3 0.0827(10) 0.1095(16) 0.0929(15) 0.0308(11) 0.0437(10) 0.0395(10)
W4 0.0739(9) 0.0531(11) 0.1143(15) -0.0164(10) 0.0202(10) 0.0165(9)
W5 0.0782(10) 0.0503(11) 0.1254(15) 0.0258(10) 0.0328(10) 0.0131(9)
W6 0.0980(11) 0.1045(16) 0.0755(14) -0.0010(11) 0.0192(10) 0.0303(12)
W7 0.0777(11) 0.0659(13) 0.1340(18) -0.0371(12) -0.0052(11) -0.0011
(9)
W8 0.0563(8) 0.0620(12) 0.193(2) 0.0464(12) 0.0430(11) 0.0008(8)
W9 0.0460(7) 0.0834(13) 0.1468(18) 0.0322(11) 0.0417(10) 0.0160(8)
W10 0.0552(8) 0.0836(13) 0.1072(15) -0.0066(10) -0.0087(9) 0.0114(9)

_geom_special_details
```

;
All esds (except the esd in the dihedral angle between two l.s. planes)
are estimated using the full covariance matrix. The cell esds are taken
into account individually in the estimation of esds in distances, angles
and torsion angles; correlations between esds in cell parameters are only
used when they are defined by crystal symmetry. An approximate (isotropic)
treatment of cell esds is used for estimating esds involving l.s. planes.
;

```
loop_
 _geom_bond_atom_site_label_1
 _geom_bond_atom_site_label_2
 _geom_bond_distance
 _geom_bond_site_symmetry_2
 _geom_bond_publ_flag
C1 C2 1.3900 . ?
C1 C6 1.3900 . ?
C1 P1 1.88(2) . ?
C2 C3 1.3900 . ?
C3 C4 1.3900 . ?
C4 C5 1.3900 . ?
C4 C7 1.547(10) . ?
C5 C6 1.3900 . ?
C7 O38 1.19(5) . ?
C7 C8 1.53(2) . ?
C9 N4 1.40(7) . ?
C9 C10 1.80(8) . ?
C10 C11 1.3900 . ?
C10 C15 1.3900 . ?
C11 C12 1.3900 . ?
C12 C13 1.3900 . ?
C13 C14 1.3900 . ?
C14 C15 1.3900 . ?
C16 N5 1.26(6) . ?
C16 C17 1.56(2) . ?
C17 C18 1.3900 . ?
C17 C22 1.3900 . ?
C18 C19 1.3900 . ?
C19 C20 1.3900 . ?
C20 C21 1.3900 . ?
C21 C22 1.3900 . ?
N1 C23 1.42(4) . ?
N1 C29 1.50(4) . ?
N1 C27 1.521(19) . ?
N1 C25 1.59(4) . ?
C23 C24 1.537(19) . ?
C25 C26 1.64(6) . ?
C27 C28 1.56(5) . ?
C29 C30 1.530(19) . ?
C31 C32 1.54(2) . ?
C31 N2 1.54(2) . ?
C33 C34 1.54(2) . ?
C33 N2 1.536(10) . ?
C35 C36 1.35(9) . ?
C35 N2 1.540(10) . ?
C37 N2 1.56(8) . ?
C37 C38 1.54(2) . ?
C39 N3 1.535(19) . ?
C39 C40 1.54(2) . ?
C41 N3 1.52(2) . ?
```

C41 C42 1.54(2) . ?
C43 C44 1.52(2) . ?
C43 N3 1.523(19) . ?
C45 N3 1.54(2) . ?
C45 C46 1.54(2) . ?
N6 C47 1.41(4) . ?
N6 C53 1.51(4) . ?
N6 C51 1.537(10) . ?
N6 C49 1.61(4) . ?
C47 C48 1.53(3) . ?
C49 C50 1.65(6) . ?
C51 C52 1.58(5) . ?
C53 C54 1.53(3) . ?
O1 W1 1.867(19) . ?
O1 W6 1.955(17) . ?
O2 W1 1.670(16) . ?
O3 P1 1.60(2) . ?
O3 W1 1.989(19) . ?
O4 W2 1.885(17) . ?
O4 W1 1.950(18) . ?
O5 P1 1.537(18) . ?
O5 W2 2.067(16) . ?
O6 W2 1.678(17) . ?
O7 W2 1.886(17) . ?
O7 W3 1.975(15) . ?
O8 W3 1.71(2) . ?
O9 W3 1.83(2) . ?
O9 W4 1.98(2) . ?
O10 W4 1.704(17) . ?
O11 W4 1.72(2) . ?
O12 W4 1.88(2) . ?
O12 W5 1.911(18) . ?
O13 W5 1.69(2) . ?
O14 W5 1.711(18) . ?
O15 W6 1.88(2) . ?
O15 W5 1.909(18) . ?
O16 W6 1.734(17) . ?
O17 Si1 1.639(15) . ?
O17 W2 2.206(16) . ?
O17 W1 2.252(14) . ?
O18 Si1 1.632(16) . ?
O18 W5 2.204(17) . ?
O18 W4 2.263(16) . ?
O19 Si1 1.613(15) . ?
O19 W8 2.318(15) . ?
O19 W9 2.315(13) . ?
O19 W3 2.335(16) . ?
O20 Si1 1.571(18) . ?
O20 W7 2.326(17) . ?
O20 W10 2.346(14) . ?
O20 W6 2.385(19) . ?
O21 W1 1.773(18) . ?
O21 W7 2.067(18) . ?
O22 W2 1.786(16) . ?
O22 W8 2.043(14) . ?
O23 W8 1.80(2) . ?
O23 W3 2.01(2) . ?
O24 W9 1.91(2) . ?
O24 W3 1.918(16) . ?
O25 W9 1.778(17) . ?
O25 W4 2.159(17) . ?
O26 W10 1.785(17) . ?
O26 W5 2.137(16) . ?
O27 W6 1.912(17) . ?
O27 W10 1.925(17) . ?
O28 W6 1.73(3) . ?

```
O28 W7 1.978(18) . ?
O29 W7 1.714(18) . ?
O30 W7 1.57(2) . ?
O30 W8 2.26(2) . ?
O31 W8 1.70(2) . ?
O32 W8 1.794(18) . ?
O32 W9 2.106(18) . ?
O33 W9 1.689(18) . ?
O34 W10 1.754(19) . ?
O34 W9 2.013(19) . ?
O35 W10 1.755(17) . ?
O36 W7 1.774(18) . ?
O36 W10 2.096(19) . ?
O37 P1 1.479(19) . ?

loop_
 _geom_angle_atom_site_label_1
 _geom_angle_atom_site_label_2
 _geom_angle_atom_site_label_3
 _geom_angle
 _geom_angle_site_symmetry_1
 _geom_angle_site_symmetry_3
 _geom_angle_publ_flag
C2 C1 C6 120.0 . . ?
C2 C1 P1 116(2) . . ?
C6 C1 P1 124(2) . . ?
C1 C2 C3 120.0 . . ?
C2 C3 C4 120.0 . . ?
C5 C4 C3 120.0 . . ?
C5 C4 C7 119(5) . . ?
C3 C4 C7 121(5) . . ?
C6 C5 C4 120.0 . . ?
C5 C6 C1 120.0 . . ?
O38 C7 C8 123(4) . . ?
O38 C7 C4 111(5) . . ?
C8 C7 C4 125(6) . . ?
N4 C9 C10 106(5) . . ?
C11 C10 C15 120.0 . . ?
C11 C10 C9 102(6) . . ?
C15 C10 C9 137(6) . . ?
C10 C11 C12 120.0 . . ?
C13 C12 C11 120.0 . . ?
C12 C13 C14 120.0 . . ?
C15 C14 C13 120.0 . . ?
C14 C15 C10 120.0 . . ?
N5 C16 C17 110(6) . . ?
C18 C17 C22 120.0 . . ?
C18 C17 C16 119(8) . . ?
C22 C17 C16 119(8) . . ?
C17 C18 C19 120.0 . . ?
C18 C19 C20 120.0 . . ?
C21 C20 C19 120.0 . . ?
C22 C21 C20 120.0 . . ?
C21 C22 C17 120.0 . . ?
C23 N1 C29 115(3) . . ?
C23 N1 C27 118(3) . . ?
C29 N1 C27 107(3) . . ?
C23 N1 C25 111(3) . . ?
C29 N1 C25 100(3) . . ?
C27 N1 C25 103(3) . . ?
N1 C23 C24 119(3) . . ?
N1 C25 C26 105(3) . . ?
N1 C27 C28 126(4) . . ?
N1 C29 C30 115(3) . . ?
C32 C31 N2 111(3) . . ?
C34 C33 N2 110(3) . . ?
```

C36 C35 N2 118(6) . . ?
N2 C37 C38 107(4) . . ?
N3 C39 C40 104(3) . . ?
N3 C41 C42 105(3) . . ?
C44 C43 N3 94(4) . . ?
N3 C45 C46 117(6) . . ?
C47 N6 C53 113(4) . . ?
C47 N6 C51 122(4) . . ?
C53 N6 C51 104(4) . . ?
C47 N6 C49 111(3) . . ?
C53 N6 C49 103(3) . . ?
C51 N6 C49 101(3) . . ?
N6 C47 C48 120(3) . . ?
N6 C49 C50 102(3) . . ?
N6 C51 C52 122(4) . . ?
N6 C53 C54 117(4) . . ?
C37 N2 C33 106(5) . . ?
C37 N2 C31 108(4) . . ?
C33 N2 C31 108(2) . . ?
C37 N2 C35 103(5) . . ?
C33 N2 C35 109(2) . . ?
C31 N2 C35 123(5) . . ?
C41 N3 C43 129(4) . . ?
C41 N3 C39 94(4) . . ?
C43 N3 C39 106(2) . . ?
C41 N3 C45 97(4) . . ?
C43 N3 C45 120(4) . . ?
C39 N3 C45 105(4) . . ?
W1 O1 W6 142.7(10) . . ?
P1 O3 W1 131.4(10) . . ?
W2 O4 W1 116.3(7) . . ?
P1 O5 W2 132.1(11) . . ?
W2 O7 W3 139.1(8) . . ?
W3 O9 W4 149.6(10) . . ?
W4 O12 W5 117.5(8) . . ?
W6 O15 W5 151.2(10) . . ?
Si1 O17 W2 128.2(8) . . ?
Si1 O17 W1 125.7(9) . . ?
W2 O17 W1 93.9(5) . . ?
Si1 O18 W5 129.1(9) . . ?
Si1 O18 W4 126.3(9) . . ?
W5 O18 W4 93.0(6) . . ?
Si1 O19 W8 126.4(9) . . ?
Si1 O19 W9 121.4(8) . . ?
W8 O19 W9 93.1(5) . . ?
Si1 O19 W3 125.0(8) . . ?
W8 O19 W3 90.7(5) . . ?
W9 O19 W3 90.2(5) . . ?
Si1 O20 W7 129.5(10) . . ?
Si1 O20 W10 122.4(9) . . ?
W7 O20 W10 92.3(5) . . ?
Si1 O20 W6 124.3(8) . . ?
W7 O20 W6 88.5(6) . . ?
W10 O20 W6 88.2(6) . . ?
W1 O21 W7 141.8(9) . . ?
W2 O22 W8 143.7(9) . . ?
W8 O23 W3 120.4(10) . . ?
W9 O24 W3 118.5(9) . . ?
W9 O25 W4 144.1(9) . . ?
W10 O26 W5 145.1(9) . . ?
W6 O27 W10 118.2(9) . . ?
W6 O28 W7 124.8(14) . . ?
W7 O30 W8 160.7(9) . . ?
W8 O32 W9 118.9(9) . . ?
W10 O34 W9 152.6(10) . . ?
W7 O36 W10 120.8(9) . . ?

```
O20 Si1 O19 108.9(9) . . ?
O20 Si1 O18 110.8(10) . . ?
O19 Si1 O18 111.6(9) . . ?
O20 Si1 O17 106.9(8) . . ?
O19 Si1 O17 105.4(8) . . ?
O18 Si1 O17 112.9(8) . . ?
O37 P1 O5 110.4(12) . . ?
O37 P1 O3 113.0(13) . . ?
O5 P1 O3 114.1(10) . . ?
O37 P1 C1 112.1(12) . . ?
O5 P1 C1 103.3(12) . . ?
O3 P1 C1 103.3(13) . . ?
O2 W1 O21 102.0(9) . . ?
O2 W1 O1 102.1(8) . . ?
O21 W1 O1 91.3(8) . . ?
O2 W1 O4 97.2(8) . . ?
O21 W1 O4 93.4(7) . . ?
O1 W1 O4 158.7(6) . . ?
O2 W1 O3 90.2(9) . . ?
O21 W1 O3 167.8(7) . . ?
O1 W1 O3 85.8(7) . . ?
O4 W1 O3 85.2(7) . . ?
O2 W1 O17 166.9(8) . . ?
O21 W1 O17 88.2(7) . . ?
O1 W1 O17 85.8(6) . . ?
O4 W1 O17 73.7(6) . . ?
O3 W1 O17 79.8(6) . . ?
O6 W2 O22 101.2(8) . . ?
O6 W2 O7 101.0(8) . . ?
O22 W2 O7 92.4(7) . . ?
O6 W2 O4 97.7(8) . . ?
O22 W2 O4 93.8(7) . . ?
O7 W2 O4 158.8(7) . . ?
O6 W2 O5 92.9(8) . . ?
O22 W2 O5 166.0(7) . . ?
O7 W2 O5 85.6(6) . . ?
O4 W2 O5 83.6(6) . . ?
O6 W2 O17 169.6(7) . . ?
O22 W2 O17 87.6(6) . . ?
O7 W2 O17 84.1(6) . . ?
O4 W2 O17 76.0(6) . . ?
O5 W2 O17 78.4(6) . . ?
O8 W3 O9 100.4(10) . . ?
O8 W3 O24 104.6(8) . . ?
O9 W3 O24 89.4(8) . . ?
O8 W3 O7 99.6(7) . . ?
O9 W3 O7 91.4(7) . . ?
O24 W3 O7 155.3(8) . . ?
O8 W3 O23 105.5(11) . . ?
O9 W3 O23 154.0(8) . . ?
O24 W3 O23 81.7(8) . . ?
O7 W3 O23 86.9(6) . . ?
O8 W3 O19 177.8(10) . . ?
O9 W3 O19 81.7(6) . . ?
O24 W3 O19 74.8(7) . . ?
O7 W3 O19 80.9(5) . . ?
O23 W3 O19 72.4(7) . . ?
O10 W4 O11 103.6(9) . . ?
O10 W4 O12 98.7(9) . . ?
O11 W4 O12 97.0(9) . . ?
O10 W4 O9 100.8(9) . . ?
O11 W4 O9 92.0(9) . . ?
O12 W4 O9 155.9(7) . . ?
O10 W4 O25 88.7(8) . . ?
O11 W4 O25 167.3(7) . . ?
O12 W4 O25 83.9(7) . . ?
```

```
O9 W4 O25 82.6(7) . . ?
O10 W4 O18 166.5(8) . . ?
O11 W4 O18 88.4(7) . . ?
O12 W4 O18 73.3(6) . . ?
O9 W4 O18 84.7(6) . . ?
O25 W4 O18 79.8(6) . . ?
O13 W5 O14 101.4(10) . . ?
O13 W5 O15 92.0(9) . . ?
O14 W5 O15 100.8(9) . . ?
O13 W5 O12 98.0(10) . . ?
O14 W5 O12 98.8(9) . . ?
O15 W5 O12 155.7(8) . . ?
O13 W5 O26 168.3(8) . . ?
O14 W5 O26 89.8(8) . . ?
O15 W5 O26 82.3(7) . . ?
O12 W5 O26 83.6(7) . . ?
O13 W5 O18 90.2(9) . . ?
O14 W5 O18 167.3(7) . . ?
O15 W5 O18 83.8(7) . . ?
O12 W5 O18 74.1(7) . . ?
O26 W5 O18 79.1(6) . . ?
O28 W6 O16 101.0(11) . . ?
O28 W6 O15 154.7(9) . . ?
O16 W6 O15 103.9(9) . . ?
O28 W6 O27 81.7(9) . . ?
O16 W6 O27 104.4(9) . . ?
O15 W6 O27 88.0(7) . . ?
O28 W6 O1 86.0(8) . . ?
O16 W6 O1 99.1(8) . . ?
O15 W6 O1 94.2(7) . . ?
O27 W6 O1 155.2(8) . . ?
O28 W6 O20 74.6(8) . . ?
O16 W6 O20 175.6(9) . . ?
O15 W6 O20 80.5(7) . . ?
O27 W6 O20 76.0(6) . . ?
O1 W6 O20 80.0(6) . . ?
O30 W7 O29 97.2(13) . . ?
O30 W7 O36 94.3(9) . . ?
O29 W7 O36 102.3(10) . . ?
O30 W7 O28 155.3(9) . . ?
O29 W7 O28 105.9(14) . . ?
O36 W7 O28 89.5(10) . . ?
O30 W7 O21 86.4(7) . . ?
O29 W7 O21 99.6(9) . . ?
O36 W7 O21 157.8(7) . . ?
O28 W7 O21 81.2(7) . . ?
O30 W7 O20 85.2(7) . . ?
O29 W7 O20 177.2(11) . . ?
O36 W7 O20 75.9(7) . . ?
O28 W7 O20 72.1(10) . . ?
O21 W7 O20 82.1(6) . . ?
O31 W8 O23 100.4(11) . . ?
O31 W8 O32 100.0(10) . . ?
O23 W8 O32 91.8(9) . . ?
O31 W8 O22 101.4(9) . . ?
O23 W8 O22 79.3(7) . . ?
O32 W8 O22 158.0(7) . . ?
O31 W8 O30 100.0(10) . . ?
O23 W8 O30 157.2(7) . . ?
O32 W8 O30 94.8(8) . . ?
O22 W8 O30 86.7(6) . . ?
O31 W8 O19 174.9(10) . . ?
O23 W8 O19 76.5(7) . . ?
O32 W8 O19 76.4(6) . . ?
O22 W8 O19 82.0(5) . . ?
O30 W8 O19 83.9(5) . . ?
```

```
O33 W9 O25 106.9(9) . . ?
O33 W9 O24 100.4(9) . . ?
O25 W9 O24 89.5(9) . . ?
O33 W9 O34 100.9(9) . . ?
O25 W9 O34 91.6(8) . . ?
O24 W9 O34 157.4(6) . . ?
O33 W9 O32 97.6(9) . . ?
O25 W9 O32 155.3(7) . . ?
O24 W9 O32 83.8(8) . . ?
O34 W9 O32 85.8(7) . . ?
O33 W9 O19 168.2(8) . . ?
O25 W9 O19 84.3(6) . . ?
O24 W9 O19 75.4(6) . . ?
O34 W9 O19 82.2(5) . . ?
O32 W9 O19 71.1(6) . . ?
O35 W10 O34 101.7(9) . . ?
O35 W10 O26 106.5(9) . . ?
O34 W10 O26 92.8(8) . . ?
O35 W10 O27 99.2(10) . . ?
O34 W10 O27 157.5(7) . . ?
O26 W10 O27 89.2(8) . . ?
O35 W10 O36 100.4(9) . . ?
O34 W10 O36 84.3(9) . . ?
O26 W10 O36 153.0(7) . . ?
O27 W10 O36 83.8(9) . . ?
O35 W10 O20 169.8(9) . . ?
O34 W10 O20 81.3(6) . . ?
O26 W10 O20 83.0(6) . . ?
O27 W10 O20 76.7(7) . . ?
O36 W10 O20 70.1(6) . . ?

_diffrn_measured_fraction_theta_max    0.964
_diffrn_reflns_theta_full              50.92
_diffrn_measured_fraction_theta_full   0.964
_refine_diff_density_max    1.167
_refine_diff_density_min   -1.069
_refine_diff_density_rms    0.200
```